

**ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
И СВОЙСТВА СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ,
ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМЕ Nd – Ca – Fe – O**

Вахромеева А.Е., Урсова А.С., Черепанов В.А., Аксенова Т.В.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Многокомпонентные твердые растворы на основе ферритов РЗ и ЩЗ металлов являются объектом многочисленных исследований в связи с возможностью их практического применения в различных областях техники, в качестве электродов ВТ ТОТЭ, кислородных датчиков, катализаторов дожигания выхлопных газов, кислородных мембран.

Для изучения кристаллической структуры образующихся сложных оксидов в системе Nd-Ca-Fe-O по глицерин-нитратной технологии было синтезировано 86 образцов с различным соотношением по металлическим компонентам. По результатам РФА установлено, что в исследуемой системе образуются пока только три ряда сложных оксидов: $\text{Nd}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeO}_{3-\delta}$, $\text{Ca}_{2-y}\text{Nd}_y\text{Fe}_2\text{O}_{5\pm\delta}$ и $\text{Ca}_{2-z}\text{Nd}_z\text{FeO}_{4\pm\delta}$.

Твердые растворы состава $\text{Nd}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ в условиях эксперимента образуются в интервале $0.0 \leq x \leq 0.35$ и кристаллизуются в орторомбической ячейке с пространственной группой $Pbnm$.

Дифрактограммы сложных оксидов со структурой браунмиллерита $\text{Ca}_{2-y}\text{Nd}_y\text{Fe}_2\text{O}_{5\pm\delta}$ ($0.0 \leq y \leq 0.5$) были проиндексированы в рамках орторомбической ячейки (пр. гр. $Pnma$).

Область гомогенности оксидов $\text{Ca}_{2-z}\text{Nd}_z\text{FeO}_{4\pm\delta}$ лежит в интервале составов $0.9 \leq z \leq 0.95$. Данный твердый раствор имеет также орторомбическую структуру, но кристаллизуется в пространственной группе $Cmca$.

Кислородная нестехиометрия (δ) сложных оксидов $\text{Nd}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($x=0.0, 0.2, 0.3$) и $\text{Ca}_{2-z}\text{Nd}_z\text{FeO}_{4\pm\delta}$ ($z=0.9, 0.95$) была изучена методом термогравиметрического анализа в интервале 298–1373 К на воздухе. Абсолютное значение кислородной нестехиометрии было определено методом прямого восстановления в токе водорода в ТГ-установке. Результаты показали, что данные сложные оксиды практически не обмениваются кислородом с газовой фазой.

Измерение термических свойств сложных оксидов $\text{Nd}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($x=0.0, 0.2, 0.3$) проводилось на спеченных при 1473 К брусках в температурном интервале 298–1373 К на воздухе методом высокотемпературной дилатометрии. Из полученных данных были рассчитаны средние значения коэффициентов термического расширения исследованных оксидов: $\text{КТР}=10.5 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ для $\text{Nd}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{FeO}_{3-\delta}$ и $\text{Nd}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{FeO}_{3-\delta}$ и $\text{КТР}=12.5 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ для $\text{Nd}_{0.8}\text{Ca}_{0.2}\text{FeO}_{3-\delta}$.